Torsion 14 [!#1]1@[x3;r5:1]@[CX4;x2;r5:2]@;-[CX4;x3;r5:3]@[!#1;r5:4]1 0.07 0.06 Probability per 10° Bin 0.05 0.04 -**Binned Counts** Fit 0.03 -**ETKDG Fit** 0.02 0.01 0.00 60 120 180 Torsion (°)